

Prüfung MuF 05 2015

- 1) Potential-Bindung im homöopolaren Molekül? (5P)
- 2) Austauschenergie beim H_2 Molekül? Wann ist es groß/klein? Wieso ist es für die Bindung wichtig? (10P)
- 3) Was kann man aus dem Rotations-Schwingungsspektrum für molekulare Größen bestimmen? (5P)
- 4) Diskutieren Sie elektrische Rotations-Schwingungsübergänge und die Entstehung von Schwingungsbanden. (10P)
- 5) Was für ein Zusammenhang besteht zwischen der Gitterebene und einem Vektor im reziproken Raum? (5P)
- 6) Erklären Sie das Auftreten von Energiebandlücken mit Hilfe des Modells der fast freien Elektronen. (10P)
- 7) Wie kann experimentell die Dispersionsrelationskurve von Phononen ermittelt werden? (5P)
- 8) Diskutieren Sie die Wärmekapazität sowohl in der klassischen als auch in der quantenmechanischen Betrachtung. (10P)
- 9) Beschreiben Sie das Bloch-Theorem eines Elektrons im harmonischen Potential. (10P)
- 10) Beschreiben Sie den Paulschen Paramagnetismus. (10P)

Molekül und Festkörper Prüfung 28.11.2018

- 1) Skizzieren Sie die wesentlichen Elemente der Born-Oppenheimer Näherung.
- 2) Diskutiere die sp -, sp^2 -, sp^3 -Hybridisierung in mehratomigen Molekülen.
- 3) Diskutiere die Laue'sche Beugungsbedingung
 - a) anhand der Ewald – Konstruktion
 - b) im Rahmen der Bragg'schen Interpretation
- 4) Wodurch unterscheiden sich ein fcc von einer hcp?
- 5) Diskutiere die Gitterenergie der Ionenkristalle
- 6) Vergleiche die Einstein - und Debye - Modelle d. spezifischen Wärme. Welche Annahmen sind in beiden Modellen zu einfach?
- 7) Franck- Condon Prinzip und die Intensität der Übergänge
- 8) Erklären Sie das Auftreten einer Energiebandlücke mit Hilfe des Modells der fast freien Elektronen.
- 9) Wodurch unterscheidet sich die Dispersionsrelation der Phononen eines primitiven kubischen Gitters von jenem eines CsCl-Gitter.
- 10) Erklären Sie die chemische Bindung von O_2 (O; $Z = 8$)

- 1) Skizziere die wesentlichen Elemente der Born-Oppenheimer Näherung. (5 Punkte)
- 2) Welche Information über molekulare Kerngrößen können aus Rotations-Schwingungsspektren von Molekülen erhalten werden? (10 Punkte)
- 3) Diskutiere das Schwingungs-Rotations-Spektrum eines 2-atomigen Moleküls. (10 Punkte)
- 4) Welche Verbesserungen des einfachen MO-oder VB-Ansatzes ermöglichen eine bessere Übereinstimmung mit den experimentellen Werten? (5 Punkte)
- 5) Was versteht man unter dem Franck-Condon-Prinzip? Diskutiere die Intensität von Schwingungsbändern in einem Molekülspektrum bei einem elektronischen Übergang an Hand des Franck-Condon-Prinzips. (10 Punkte)
- 6) Diskutiere die Laue'sche Beugungsbedingung:
(a) anhand der Ewald-Konstruktion;
(b) im Rahmen der Brägg'schen Interpretation. (10 Punkte)
- 7) Erläutere den Atomfaktor und den Strukturfaktor bei der Röntgenbeugung. (10 Punkte)
- 8) Skizziere die 1. Brillouin-Zone eines ebenen Rechteckgitters. (5 Punkte)
- 9) Wodurch unterscheidet sich akustische von optischen Phononen? (5 Punkte)
- 10) Vergleiche die Einstein- und Debye-Modelle der spezifischen Wärme. Welche Annahme ist im Einstein-Modell zu einfach? (10 Punkte)

- ✓ 1) Diskutiere die unterschiedlichen Überlegungen in der Valenzbindungsnahe rung (VB) und in der Molekülorbitalnahe rung (MO) zur Beschreibung der Molekülbindung in einem 2-atomigen Molekül. (10 Punkte)
- ✓ 2) Skizziere die bindenden und antibindenden Wellenfunktionen in einem homonuklearen 2-atomigen Molekül. (5 Punkte)
- ✓ 3) Diskutiere das Schwingungs-Rotations-Spektrum eines 2-atomigen Moleküls. (10 Punkte)
- ✓ 4) Diskutiere die chemische Bindung im Li_2 Molekül. (5 Punkte)
- ✓ 5) Was versteht man unter dem Franck-Condon-Prinzip? Diskutiere die Intensität von Schwingungsbändern in einem Molekülspektrum bei einem elektronischen Übergang an Hand des Franck-Condon-Prinzips. (10 Punkte)
- ✓ 6) Wodurch unterscheidet sich ein kubisch-flächenzentriertes Gitter (fcc) von einer hexagonalen dichtesten Kugelpackung (hcp)? (5 Punkte)
- ✓ 7) Erläutere den Atomfaktor und den Strukturfaktor bei der Röntgenbeugung. (10 Punkte)
- ✓ 8) Skizziere die 1. Brillouin-Zone eines ebenen Parallelogrammgitters. (5 Punkte)
- ✓ 9) Wodurch unterscheidet sich die Dispersionsrelation der Phononen eines primitiven kubischen Gitters von jener eines CsCl-Gitters? (10 Punkte)
- ✓ 10) Vergleiche die Einstein- und Debye-Modelle der spezifischen Wärme. Welche Annahme ist im Einstein-Modell zu einfach? (10 Punkte)

Molekül- und Festkörperphysik

Gedächtnisprotokoll vom 15.6.2015

80 pts insgesamt (6x10pts,4x5pts)

- 1) Elektronenkonfiguration von b2 ($Z=5$)
- 2) Arten von Para-Diamagnetismus
- 3) Konzept von Bravais Wiener-Seitz Zelle
- 4) Sp sp² sp³ Bindungen von mehratomigen Molekülen
- 5) Debye Petit (oder so, irgendwas mit spezifischer Wärme von Elektronen)
- 6) Atom/Struktur Faktor
- 7) Zustandekommen von Energiebändern und Bandlücken
- 8) Zusammenhang zwischen Gitterebene und Vektoren im reziproken Gitter
- 9) Statische Abschirmung des Elektronengases
- 10) Einstein - Debye Unterschiede und falsche Annahmen

Zusammenfassung der MOF - Prüfung vom 24.03.2015

- | | |
|---|------|
| 1) Franck Condon Prinzip & Intensität der Übergänge | 10 P |
| 2) Diskutiere die Elektronenkonfiguration von N ₂ . | 5 P |
| 3) Diskutiere die Van der Waals Wechselwirkung und das Lennard-Jones Potential | 10 P |
| 4) Konzept des Bravaisgitters und der Wigner-Seitz Zelle | 5 P |
| 5) Diskutiere den Unterschied zwischen der akustischen und optischen Phononendispersionsrelation bzw. Longitudinaler / transversaler, akustischer und optischer Phononen. | 10 P |
| 6) Diskutiere das statische Verhalten des freien Elektronengases | 10 P |
| 7) Diskutiere die Einstein- und Debye- Näherung der Wärmekapazität | 10 P |
| 8) Diskutiere den Beitrag der Elektronen zur Wärmekapazität | 5 P |
| 9) Was besagt das Bloch Theorem bzw. die Bloch Funktion? | 5 P |
| 10) Welche Arten von Dia- und Paramagnetismus kennen sie ? | 10 P |

Molekül- und Festkörperphysik, Prüfung vom 31.10.2013

Bindungszustände / Elektronenkonfiguration in N_2 diskutieren (5P)

Skizzieren sie die wesentlichen Elemente der Born-Oppenheimer Näherung (5P)

Erklärung von Hybridisierung anhand sp, sp² und sp³ (10P)

Lennard-Jones Potential und Van der Waals Bindung (10P)

Diskutiere die Laue'sche Beugungsbedingung (10P)

- a) Anhand der Ewald-Konstruktion
- b) Im Rahmen der Bragg'schen Interpretation

Skizziere die 1. Brillouin-Zone eines ebenen hexagonalen Gitters. (5P)

Gitterenergie in einem Ionenkristall (10P)

Röntgenbeugung mit der Dreh(oder Ein?)kristallmethode (10P)

Vergleiche Einstein- und Debye-Modell der spezifischen Wärme. Welche Annahme ist in BEIDEN Modellen zu einfach? (10P)

Molekül- und Festkörperphysik

Gedächtnisprotokoll vom Juli 2017

- 1) Zeichne das Potential eines homöopolaren Moleküls. Beschreiben sie es qualitativ. (5 Pts)
- 2) Was bewirkt die Austauschenergie beim H_2 Molekül? Wann ist sie groß/klein? Wieso ist sie für die chemische Bindung wichtig? (10P) (Ca dieser Wortlaut) (10 pts)
- 3) Was kann man aus dem Rotations-Schwingungsspektrum für molekulare Größen bestimmen? (5P)
- 4) Diskutieren Sie elektrische Rotations-Schwingungsübergänge und die Entstehung von Schwingungsbanden. (10P)
- 5) Wie kann experimentell die Dispersionsrelationskurve von Phononen ermittelt werden? (5P)
- 6) Diskutieren Sie die Wärmekapazität sowohl in der klassischen als auch in der quantenmechanischen Betrachtung. (10P)
- 7) Was für ein Zusammenhang besteht zwischen der Gitterebene und einem Vektor im reziproken Raum? (5P)
- 8) Erklären Sie das Auftreten von Energiebandlücken mit Hilfe des Modells der fast freien Elektronen. (10P)
- 9) Beschreiben Sie das Bloch-Theorem eines Elektrons im harmonischen Potential. (5P)
- 10) Diskutieren sie die Zustandsdichte in Schwingungsspektren von Festkörpern. (10 pts)

Molekül- und Festkörperphysik

Prüfung vom 5.5.2015

- 1) Skizzieren Sie den Verlauf der Potentialkurve für ein homöopolares Molekül.
Erklären Sie sie qualitativ.
- 2) Erklären Sie die Herkunft der 'Austauschenergie' in H_2 .
Wann ist sie groß, wann klein?
Warum ist sie entscheidend für die chemische Bindung?
- 3) Welche Informationen über molekulare Kenngrößen können aus Rotations-Schwingungsspektren von Molekülen erhalten werden?
- 4) Diskutiere einen elektronischen Übergang in einem 2-Atomigen Molekül und die daraus resultierenden Schwingungsbanden im Spektrum
- 5) Diskutiere den Zusammenhang zwischen Gitterebene im Kristall und Vektoren des reziproken Gitters
- 6) Diskutieren Sie die Wärmekapazität des Gitters im Rahmen des klassischen und der Quantenmechanik
- 7) Wie ermittelt man experimentell eine Phononendispersionskurve?
- 8) Erklären Sie das Zustandekommen von Energiebändern in Festkörper im Rahmen der Theorie der fast-freien Elektronen
- 9) Erklären Sie das Bloch'sche Theorem für Elektronen im periodischen Potential
- 10) Diskutieren Sie den Paulschen Paramagnetismus

513.001 Molecular and Solid State Physics

24.04.2015

Problem 1

At very low temperatures, He_2 molecules will form. A helium atom has two protons and two electrons. These molecules are held together by Van Der Waals forces.

- (a) Write down the molecular orbital Hamiltonian that needs to be solved to find the molecular orbitals.
 - (b) What linear combination of atomic orbitals would you guess would be a good solution to the molecular orbital Hamiltonian?
 - (c) If the molecular orbitals are called $\phi_{\text{mo}1}$, $\phi_{\text{mo}2}$, $\phi_{\text{mo}3}$, \dots ; what is the many-electron ground-state wavefunction for a He_2 molecule?
-

Problem 2

Gold has an fcc crystal structure. Suppose you have a table of the atomic form factor of gold and you want to calculate the ratio of the squares of the structure factors for the 111 and 300 reflections,

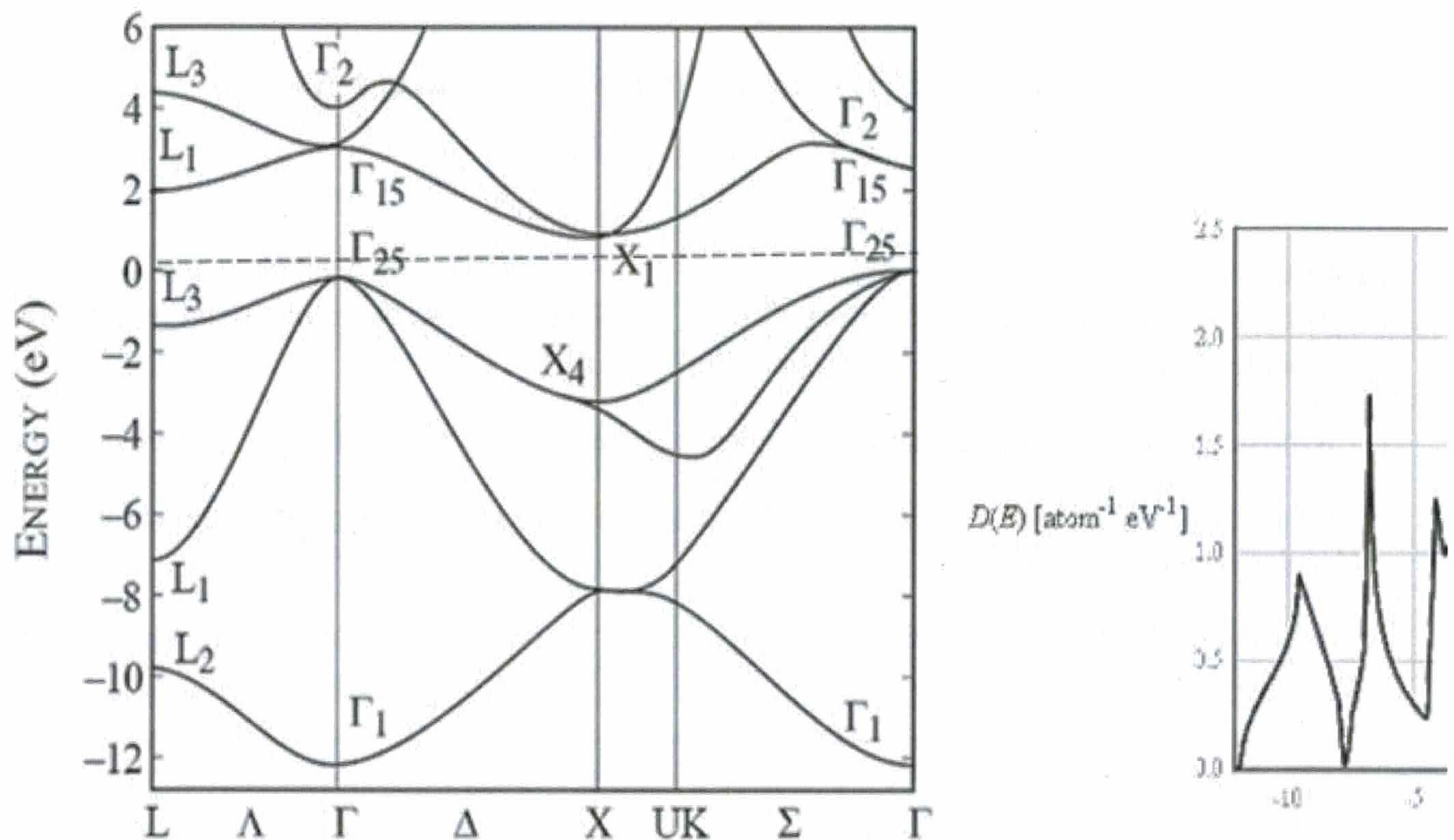
$$\frac{n_{111}^2}{n_{300}^2}.$$

Describe how you could perform this calculation.

Problem 3

The electronic band structure and corresponding density of states for a material is shown below. The Fermi energy is indicated by the dotted line.

(See other side)



(a) Is this a material a good thermal conductor? Why or why not?

(b) How would you compute the electronic component of the specific heat from this data? Sketch the approximate form of the specific heat as a function of temperature.

Problem 4

A polymer can be considered to be a one dimensional crystal where the monomer is the unit cell. Draw approximately the electron dispersion (E vs. k) for a polymer. Most monomers have an even number of electrons. This is because molecules with an odd number of electrons are radicals and are chemically unstable. If there are an even number of electrons in the unit cell, is this a metal or an insulator? Explain your reasoning.